



TITLE:

金属表面の物性解析

AUTHOR(S):

陳, 友晴

CITATION:

陳, 友晴. 金属表面の物性解析. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 51-51

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251131>

RIGHT:

金属表面の物性解析

Analysis on properties of metallic surfaces

京都大学大学院エネルギー科学研究科 陳友晴

研究成果概要

ナノポーラス金は、表面に微小な格子ひずみを有する多孔質材料であり、圧縮ひずみに基づく分極効果によって様々な生体タンパク質の機能・活性に影響を及ぼすことが明らかにされている¹⁾。先行研究では、大腸菌に対して優れた抗菌性を示し²⁾、一方で接着した HeLa 細胞に対しては細胞のアポトーシス(自発死)を誘導することが示された³⁾。最近では間葉系幹細胞の接着率を低下させ、分化や増殖に影響を及ぼすことも明らかにされている。細胞に対するナノポーラス金の影響は、基板に吸着した細胞外マトリクスを介して伝わるものの、ナノポーラス金が細胞外マトリクスの構造やダイナミクスに及ぼす影響は十分に理解されていない。本研究では分子動力学(MD)計算を実行し、原子オーダーでの細胞外マトリクスの吸着ダイナミクスの解明を試みた。

Type-1 ヒトコラーゲン分子のアミノ酸配列をもとに、細胞接着モチーフである GFOGER(グリシン-フェニルアラニン-ヒドロキシプロリン-グリシン-グルタミン酸-アルギニン)配列を含む 60 残基×3 鎖を取り出したコラーゲン分子断片(CMS)モデルを作成した。ナノポーラス金表面は平滑金(111)面に対して 5%の圧縮格子ひずみを加えた 6 原子層厚モデルとして定義された¹⁻³⁾。また、ナノポーラス金の分極効果を MD 計算に取り入れるため、仮想電子を付加した誘起双極子金表面モデルを使用した。作成した CMS を平滑金、ナノポーラス金モデル上に配置した後、水分子(TIP3P モデル)とカウンターイオンを付加して、MD 計算(NAMD2.13)を 50 ns 間実行した。得られたトラジェクトリーに対して吸着率や吸着エネルギー、基準振動モード等の解析を行った。

ナノポーラス金上では、吸着に関与する残基が増える一方で、吸着率や吸着エネルギーが平滑金よりも低くなった。この結果は、ナノポーラス金上にて多くの残基が吸着と脱着を頻繁に繰り返していることを示している。基準振動解析では、ナノポーラス金上での主要なダイナミクスが、ねじれや局所的な横波振動を伴う協調性の低い運動であることがわかった。局所的なねじれや振動は、金表面への吸着の安定性を低下させ、GFOGER 等の細胞接着に関わる配列を時間的に大きく変形させた。また、ナノポーラス金表面特有の格子ひずみによりアミノ酸の吸着サイトが変形した結果、多くの残基が吸着を阻害されふらつく様子が観察された。ナノポーラス金表面では、従来知られていた格子ひずみによる分極効果よりも、格子配置の幾何学的配置の乱れが CMS の吸着ダイナミクスに支配的な影響を及ぼすことが示された。結果として CMS の局所的なねじれや振動が誘導され、細胞との安定的な結合が阻害されたと考えられる。

参考文献 ,発表論文 : 1) N. Miyazawa et al., Sci. Rep. **8** (2018) 3870.

2) N. Miyazawa et al., Sci. Rep. **9** (2019) 1091.

3) S. Deguchi et al., Materialia **7** (2019) 100370.